# AXSP 中热散射截面计算模块 ThermalXS 的开发与验证[1]

王福星 傅联涛 马续波*

（1.华北电力大学 核科学与工程学院，北京 102206）

**摘要：**本工作首先基于中子热散射理论，在自主开发的评价核数据处理程序 AXSP 中开发了中子热散射截面计算模块 ThermalXS，基于 U、H、Zr 等核素的热散射律文件计算出不同类型的中子热散射截面，并与 NJOY2016 程序中的 THERMR 模块的计算结果对比，验证了 ThermalXS 模块热中子计算的正确性。相比于 THERMR 模块，ThermalXS 使用了自适应入射能量网格技术，可以保证金属氢化物热散射截面更精确，并且 ThermalXS 可以处理一声子修正的热散射率数据。本文分析对比了 ENDF/B-VII.1、ENDF/B-VIII.0、ENDF/B-VIII.1 评价核数据库中石墨热散射截面的变化，并与实验值进行了对比，研究发现：最新 ENDF/B-VIII.1 引入非立方公式与一声子修正的石墨热散射截面相比使用非相干近似的截面与实验值符合更好；计算得到的 ENDF/B-VIII.1 中反应堆石墨热散射截面具有随孔隙度增大而增大的规律，但是仍远小于具有孔隙度的石墨实验数据，说明热散射数据生成模块的功能有待进一步完善。

**关键词：**中子热散射；双微分散射截面；ThermalXS；核反应堆石墨

**中图分类号：TL329** **文献标识码： A** **DOI:**

**收稿日期：**2024-10-22;**修改日期：**2024-11-29

**基金项目：**国家自然科学基金（11875128）

**第一作者简介：**王福星，男，硕士研究生，现主要从事反应堆物理计算和评价核数据库处理;E-mail：fx280011@ncepu.edu.cn

**通讯作者：**马续波，E-mail：maxb@ncepu.edu.cn

# 0 引言

随着国内外核反应堆技术的迅速发展，对于核反应堆的实际应用计算要求也随之提高。在进行核反应堆物理计算的过程中，需要考虑各个能区的中子散射情况，其中处于热能区的中子对应的中子热散射对于核反应堆的安全设计、中子输运计算以及临界安全分析等计算具有重要影响[1]，例如中子热散射在对氢化锆、氢化锂材料的正温度效应影响中占主导地位[2]。当中子处于热能区时，中子与靶核之间的散射因为靶核热运动、散射波的干涉效应和化学键的影响而变得复杂，导致次级中子能量和角度分布、散射截面的计算需要考虑更多因素[3]。随着数值反应堆等概念的提出，核反应堆设计对热中子散射截面提出了更高精度要求。由于石墨良好的中子慢化性能，已被广泛应用于熔盐堆、高温气冷堆等第四代反应堆设计。高精度的石墨热中子截面不仅是对反应堆物理计算，还是反应堆安全都具有重要影响，因此有必要对石墨的高精度热中子截面开展研究。

从上世纪 60 年代开始，国内外针对热中子散射截面进行了大量研究，并开发了许多热中子截面处理软件，如北卡罗来纳州立大学核工程系研发的 FLASSH[4]，美国通用原子能公司研发的 HEXSCAT[5]，美国萨凡纳河国家实验室研发的 FLANGE-II[6]以及美国洛斯阿拉莫斯国家实验室研发的 NJOY[7]等程序。国内针对评价核数据处理程序也有深入研究，如西安交通大学研发的 NECP-Atlas[8]，清华大学研发的 RXSP[9]以及中国原子能科学研究院研发的 Ruler[10]，华北电力大学研发的先进核数据处理软件 AXSP[11]等。本文首先深入研究了中子热散射理论，然后采用面向对象编程的 Fortran2003，在 AXSP 中进一步完善了热散射截面计算模块 ThermalXS 的计算功能。通过与 NJOY2016 软件中的 THERMR 模块计算结果比较，来验证 ThermalXS 计算的准确性。并基于 ENDF/B-VII.1 库、ENDF/B-VIII.0 库以及 ENDF/B-VIII.1 库中石墨热中子散射律数据，将 ThermalXS 计算得到的热散射截面与实验结果作对比，得到不同数据库以及不同孔隙度热中子散射律数据对石墨热散射截面的影响。发现 ENDF/B-VIII.1 引入一声子修正的热散射文件计算结果准确度相比之前版本具有较大提升，与 Steryerl 多晶石墨实验数据符合良好，说明引入一声子修正可有效改善非相干近似引入的误差；对比 ENDF/B-VIII.1 孔隙度 10%20%30%的反应堆石墨，发现石墨热散射截面随孔隙度增大而增大，但是计算得到的 $10^{-2}eV$ 以下热散射截面仍远小于具有孔隙度的实验数据。

# 1 中子热散射截面计算理论

热散射截面的类型，国内外目前主要考虑三种，分别是非相干非弹性散射、非相干弹性散射、相干弹性散射[12]。下面分别介绍了三种类型的散射截面的理论模型。

## 1.1 热中子散射律

在反应堆物理中，裂变产生的快中子经过慢化成为热中子，由于热中子能量接近靶核能量，在散射时会受到散射核热运动、散射波的干涉效应及化学键的影响，产生相当复杂的散射，这一系列影响与靶核材料本身的晶体、分子性质密切相关，ENDF/B 评价核数据以 File7 文件中的热散射律数据(TSL)来描述不同材料在热能区与中子的散射性质。

热散射律数据分三种： $S(\alpha,\beta,T)$是 ENDF 中描述非弹性散射的热散射律数据，因为热中子与各种靶核材料都会发生非相干非弹性散射，所以 $S(\alpha,\beta,T)$是每个热散射律文件都会有的；对于含氢的固体材料如：ZrH、固态甲烷、聚乙烯等，需要考虑非相干弹性散射[13]，ENDF 中用德拜沃勒因子 $W(T)$来描述；涉及到晶体材料如：石墨、BeO、$UO_2$、$SiO_2$等，由于布拉格衍射需要考虑其相干弹性散射，要用到 $S(E,T)$。目前 ENDF/B-VIII.1 库中热散射律数据主要由 NJOY-LEAPR 程序、FLASSH 程序生成。

### 1.2 非相干非弹性散射

非相干非弹性散射的双微分散射截面计算公式为：

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{dE'd\Omega}\left(E\to E',\mu,T\right)=\sum_{n=0}^{NS}\frac{M_n\sigma_{bn}}{4\pi kT}\sqrt{\frac{E'}{E}}e^{-\beta/2}S_n(\alpha,\beta,T) \tag{1}$$

其中 $\sigma$ 为散射截面；NS 为非主散射原子类型的数量；$k$ 是玻尔兹曼系数；$T$ 为温度，单位为 $K$；$E'$为次级中子能量（$eV$），$E$ 为入射中子能量（$eV$）； $\mu$ 为散射角余弦（实验系）；$M_n$ 为靶核材料中第 n 种原子的数量；$S_n(\alpha,\beta,T)$表示散射函数，其对应于散射律数据，在对(1)进行计算时，可从 File7 中读取使用；$\sigma_{bn}$ 为材料中第 n 个靶核的特征非相干截面；$\alpha$和$\beta$都是无量纲，分别表示中子的动量转移量和能量转移量，用以表征中子散射前后角度和能量的变化[15]；其中$\alpha$、$\beta$和$\sigma_{bn}$具体可表示为：

$$\alpha=\frac{E'+E-2\mu\sqrt{EE'}}{A_0kT} \tag{2}$$

$$\beta=\frac{E'-E}{kT} \tag{3}$$

$$\sigma_{bn}=\sigma_{fn}\left(\frac{A_n+1}{A_n}\right)^2 \tag{4}$$

式中，$A_0$ 为分子中主要散射原子的质量；$\sigma_{fn}$ 表示第 n 种原子的自由原子散射截面；$A_n$ 表示第 n 种原子与中子质量的质量比。

在实际计算过程中，由于需要对散射律的数据进行插值，且 $S_n(\alpha,\beta,T)$在使用时有对应的温度 $T$。如果入射中子能量过高时，$\alpha$和$\beta$可能会超出 Flie7 中 $S_n(\alpha,\beta,T)$给出的值。此时的 $S_n(\alpha,\beta,T)$则无法从 File7 中读取，

需要使用短碰撞时间(SCT)近似求得 $S_n(\alpha,\beta,T)$，求解公式如下：

$$S^{SCT}(\alpha,\beta,T)=\frac{\exp[-\frac{(\alpha-|\beta|)^2T}{4\alpha T_{eff}(T)}-\frac{|\beta|}{2}]}{\sqrt{4\pi\alpha\frac{T_{eff}(T)}{T}}} \tag{5}$$

式中，$T_{eff}$ 是有效温度，具体数值在 Flie7 中给出，其他符号含义与前文公式一致。虽然 ENDF 格式的散射律数据包含了许多常见材料的数据，但大部分核素的散射律数据并没有提供。针对这些没有散射律数据的核素的热散射截面计算，一般可采用自由气体模型近似认为中子与靶核发生散射，所有原子核都处于自由热平衡运动状态，不受化学键束缚。利用自由气体模型计算双微分散射截面，其计算公式与(1.1)相似，区别是 $S_n(\alpha,\beta,T)$需要单独计算，无需读取 Flie7 的数据，$S_n(\alpha,\beta,T)$的计算公式如下：

$$S_n(\alpha,\beta,T)=\frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}}\exp(-\frac{\alpha^2+\beta^2}{4\alpha}) \tag{6}$$

此外，根据自由气体模型计算双微分散射截面，通常将中子的弹性散射截面认为是常数，这就导致对于一些非气体材料或是晶体材料的计算精度降低。

### 1.3 非相干弹性散射

在含氢固体中存在弹性散射分量，热中子与这类材料如：聚乙烯和 $ZrH_x$ 发生碰撞时会发生非相干弹性散射，弹性散射可以用非相干近似来处理。ENDF 给出的非相干弹性散射的双微分截面公式为：

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E\rightarrow E',\mu,T)=\frac{\sigma_b}{4\pi}\mathrm{e}^{-2EW'(T)(1-\mu)}\delta(E-E') \tag{7}$$

式中，$\sigma_b$ 为特征散射截面，$W'$为德拜沃勒因子（$eV^{-1}$）。

### 1.4 相干弹性散射

涉及晶体材料与热中子的散射反应时，由于晶体的特殊结构，中子发生的散射具有衍射性质，故相干弹性散射需要着重考虑，其双微分截面的公式为：

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E\rightarrow E',\mu,T)=\frac{1}{E}\sum_{i=1}^{E_i<E}s_i(T)\delta(\mu-\mu_i)\delta(E-E')/2\pi \tag{8}$$

式中，$E_i$ 为小于入射能量 $E$ 的第 $i$ 个布喇格边界；$s_i$ 与结构因子成正比；$\mu_i$ 为每个晶格平面的特征散射角余弦，其表达式为：

$$\mu_i=1-2E_i/E \tag{9}$$

一般在对相干弹性散射的双微分截面进行计算时，可将双微分截面的公式化简为如下公式：

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E\to E',\mu,T)=\frac{1}{E}S(E,T)\delta(\mu-\mu_i)\delta(E-E')/2\pi \tag{10}$$

在实际计算中可通过 Flie7 得到 $S(E,T)$。对于入射能量的值，可以读取 ENDF 文件中 Flie3 内关于弹性散射的入射能量数据。当入射能量确定时，根据(10)和(9)可知，出射能量和散射角余弦也是确定的，故(10)可化简为如下式子：

$$\sigma(E)=\frac{1}{2\pi E}S(E,T) \tag{11}$$

从(11)可知，相干弹性散射截面的计算值等价于双微分相干散射截面的计算值。

# 2 ThermalXS 程序的开发和验证

## 2.1 程序概况

基于三种热中子散射计算公式，利用 Fortran2003 语言，基于面向对象编程思想，开发了热散射截面数据处理模块 ThermalXS。该程序具备 NJOY 中 THERMR 程序的主要功能，可以根据 ENDF 中 Flie7 提供的散射律数据，以及不同核素的性质，计算生成对应的核反应堆计算所需的热散射截面数据，同时也进一步完善了 AXSP 软件的功能。

## 2.2 程序设计

首先对 Flie7 中的数据按照不同核素，不同散射类型进行读取分类和插值计算。针对于自由气体模型，由于无需读取，因此在计算热散射截面时，先在程序中自行计算 $S(\alpha,\beta)$的值，在求解 $S(\alpha,\beta)$前，需要提前计算$\alpha$和$\beta$。根据公式(1)和(3)可知，$\alpha$和$\beta$与入射能量、出射能量以及散射角余弦有关。在程序中对于入射能量的取值，一般进行能量网格的划分，考虑到入射中子为热能区中子，将入射能量由低到高划分出 118 个能量点，最低设置为 $1\times10^{-5}$ $eV$，最高为 4 $eV$。同时对$\beta$也进行网格划分，一共划分 45 个值，由低到高划分，最小为 0，最大为 3500。对于散射角余弦，采用倒栈法，让$\mu$从(-1,1)的区间代入公式(6)中，同时结合之前划分的入射能量和$\beta$网格求得$\alpha$和出射能量的值。将每一次$\mu$倒栈得到的值记录，最终可以得到$\mu$和 $S(\alpha,\beta)$的线性关系，根据线性关系对(1) 进行关于$\mu$的高斯勒让德积分，得到微分截面 $\sigma(E,E')$，之后 $\sigma(E,E')$再分别对每个入射能量点下的 $E'$进行梯形积分，得到自由气体模型下的非相干非弹性截面 $\sigma(E)$。由于最终需要生成散射概率密度，因此还需要计算散射概率 $P(E\to E')$，计算公式为：

$$P(E \to E') = \frac{\sigma(E \to E')}{\sigma(E)} \tag{12}$$

对于有 Flie7 数据的核素，在读取完数据后，需要对 $S_n(\alpha,\beta,T)$、$\alpha$、$\beta$分别进行插值，因此无需对$\beta$进行网格划分，但入射能量网格的划分与自由气体模型一致。在完成对数据的插值后，再根据不同类型的散射情况，代入对应的公式，得到对应的散射截面。具体插值过程，插值方式和积分过程与自由气体模型类似，不做过多赘述。最后将计算出的截面数据处理成 PENDF 格式文件，再输出成 ACE 格式文件以供实际使用。按照上述步骤，ThermalXS 的主要运行框架如图 1 所示：

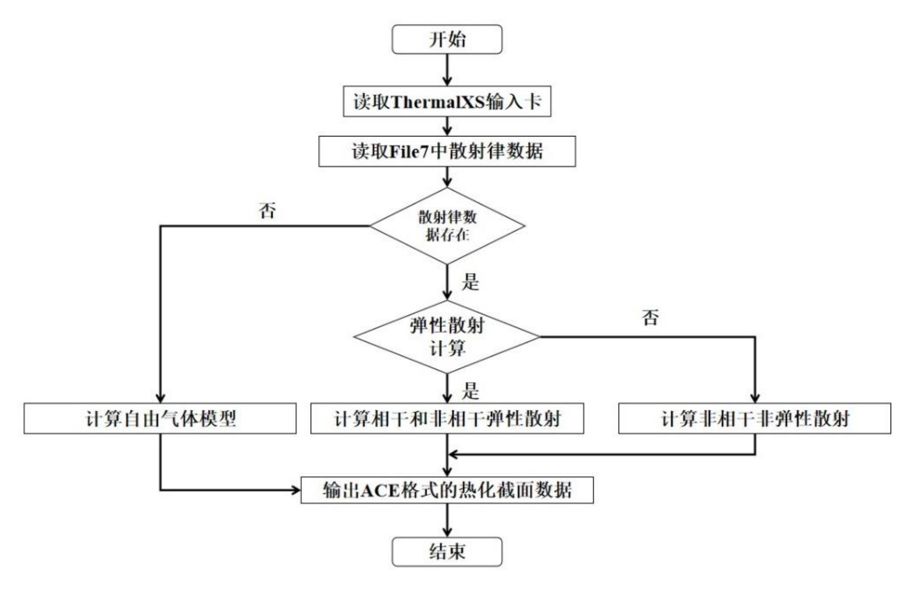



图 1  ThermalXS 的运行框架

## 2.3 程序数值验证

使用ThermalXS程序在296K温度条件下进行热散射截面计算并与NJOY-THERMR程序计算结果对比，$UO_2$ 中 $^{235}U$ 的相干弹性散射截面和非相干非弹性散射截面如图 2、图 3 所示， $H_2O$ 中 $^{1}H$ 的非相干非弹性散射截面如图 4 所示， ZrH 中 H 的非相干弹性散射截面如图 5 所示。使用自由气体模型计算的 $UO_2$ 中 $^{235}U$ 的非相干弹性散射截面值如图 6 所示。结果显示，ThermalXS 与 NJOY 的计算结果符合良好，能够保证程序计算的准确性。ThermalXS 模块的计算结果以 pendf 格式储存于文件中，可供后续 GroupXS 模块基于两体及多体动力学计算多群截面常数[18]。

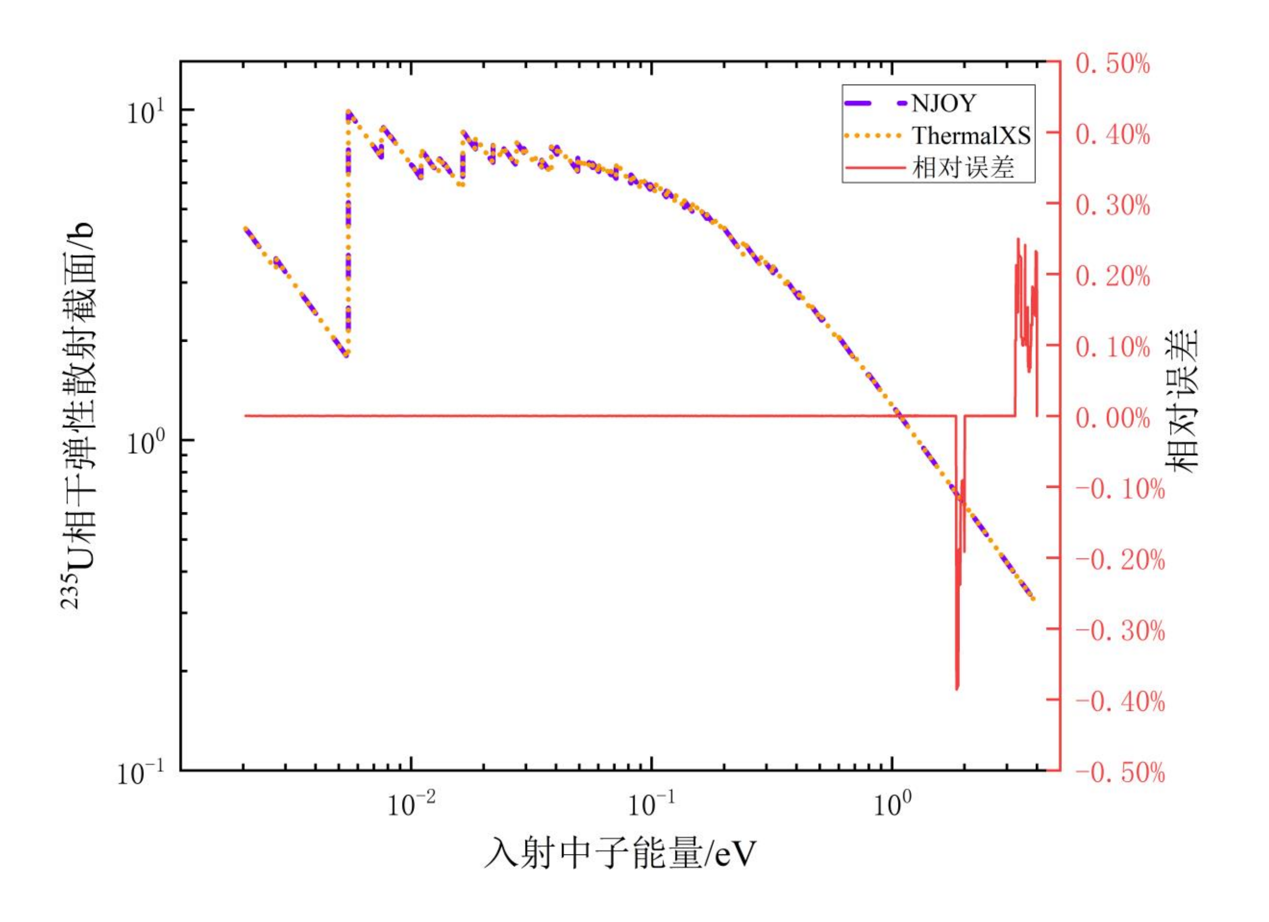



图 2 $^{235}$U 的相干弹性散射截面(在线彩图)

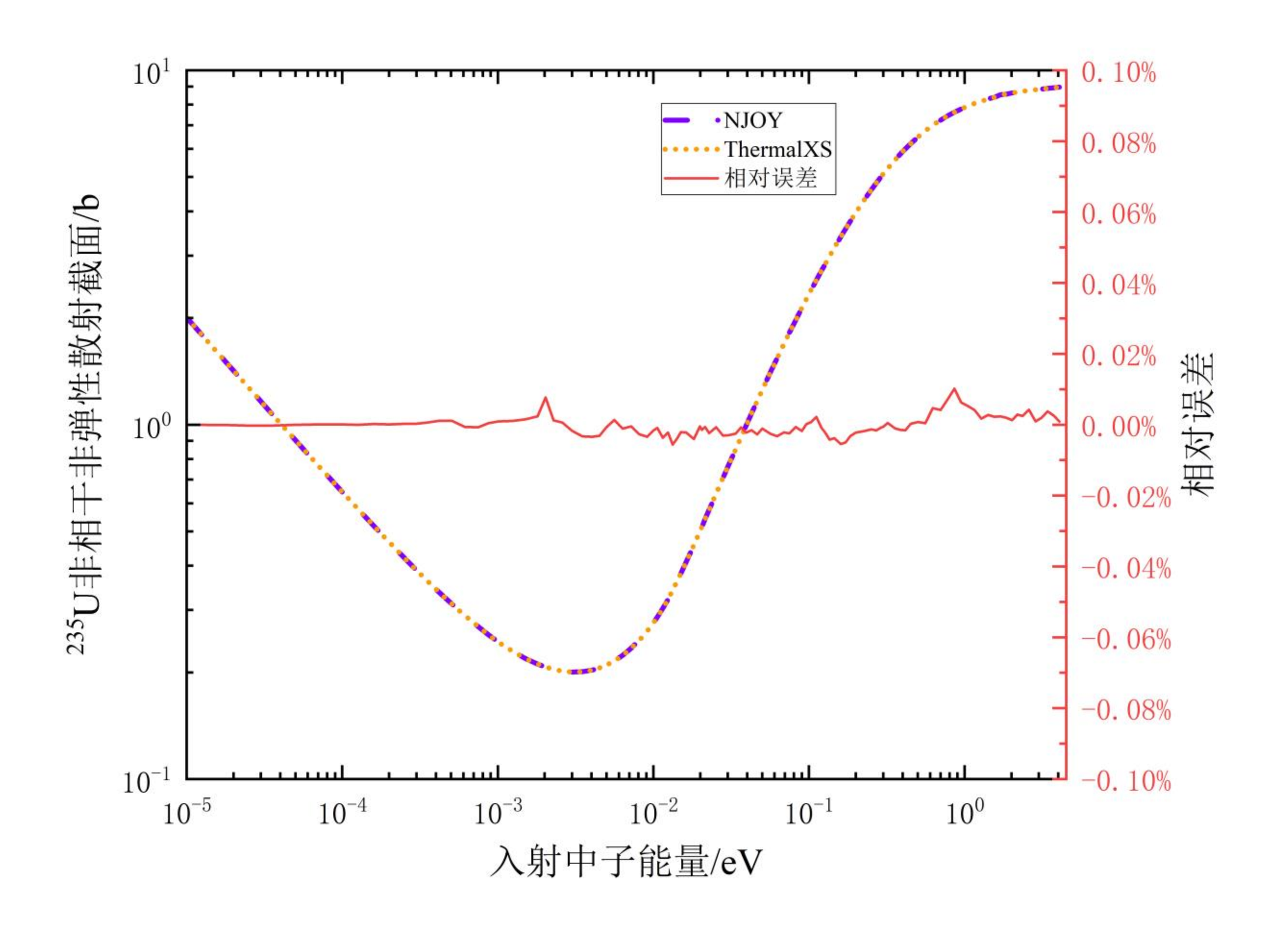



图 3 $^{235}$U 的非相干非弹性散射截面(在线彩图)

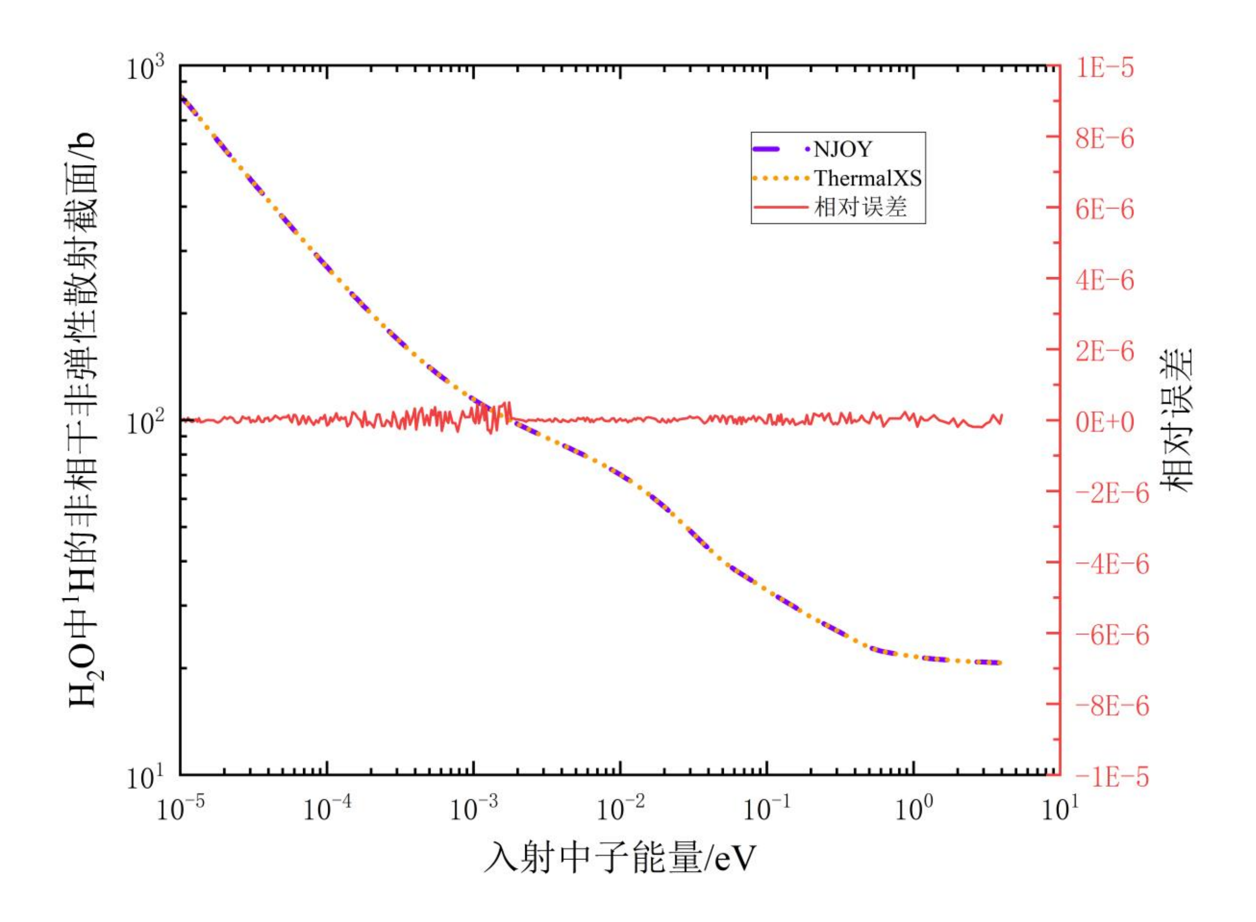



图 4 $^1$HinH$_2$O 的非相干非弹性散射截面(在线彩图)

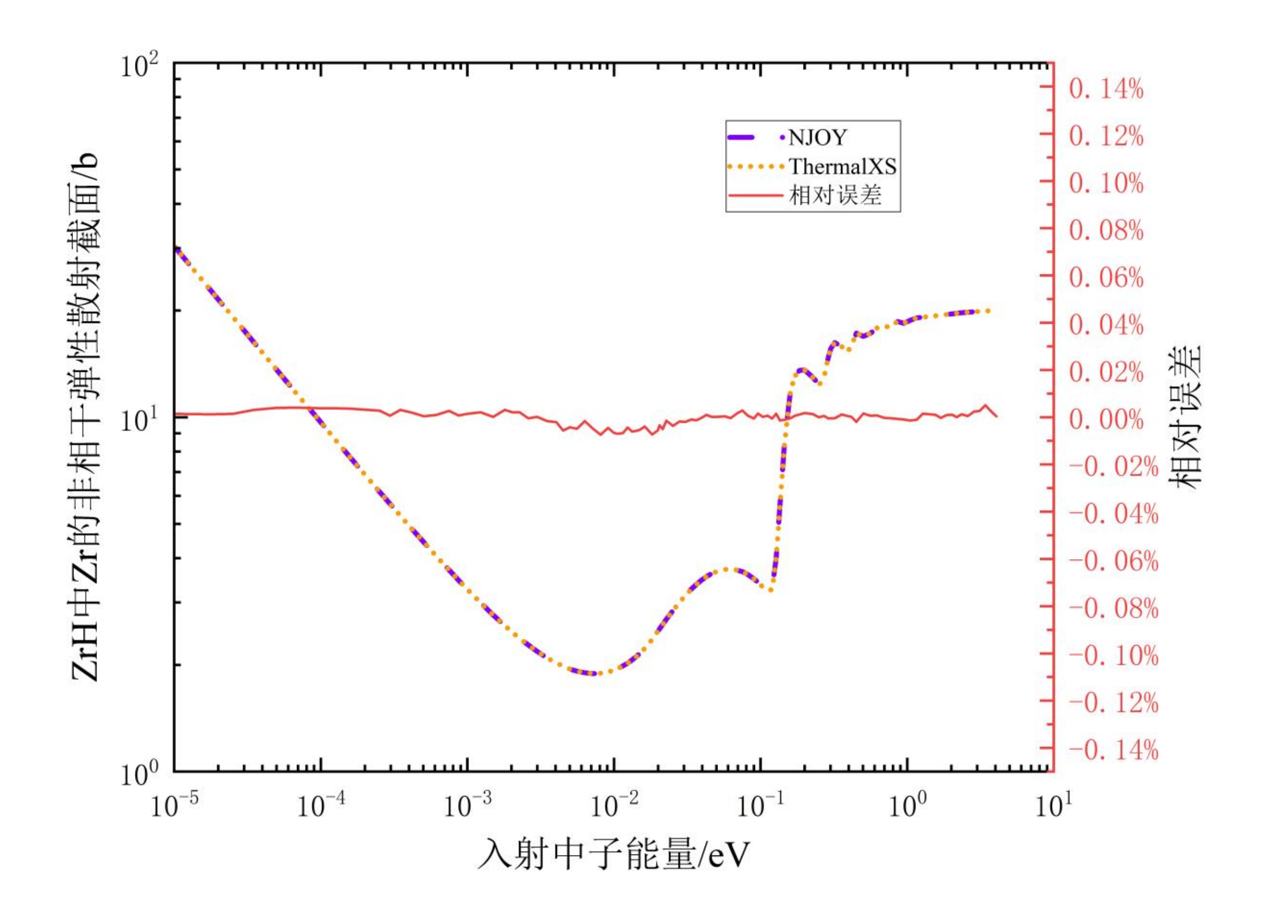



图 5 HinZrH 的非相干弹性散射截面(在线彩图)

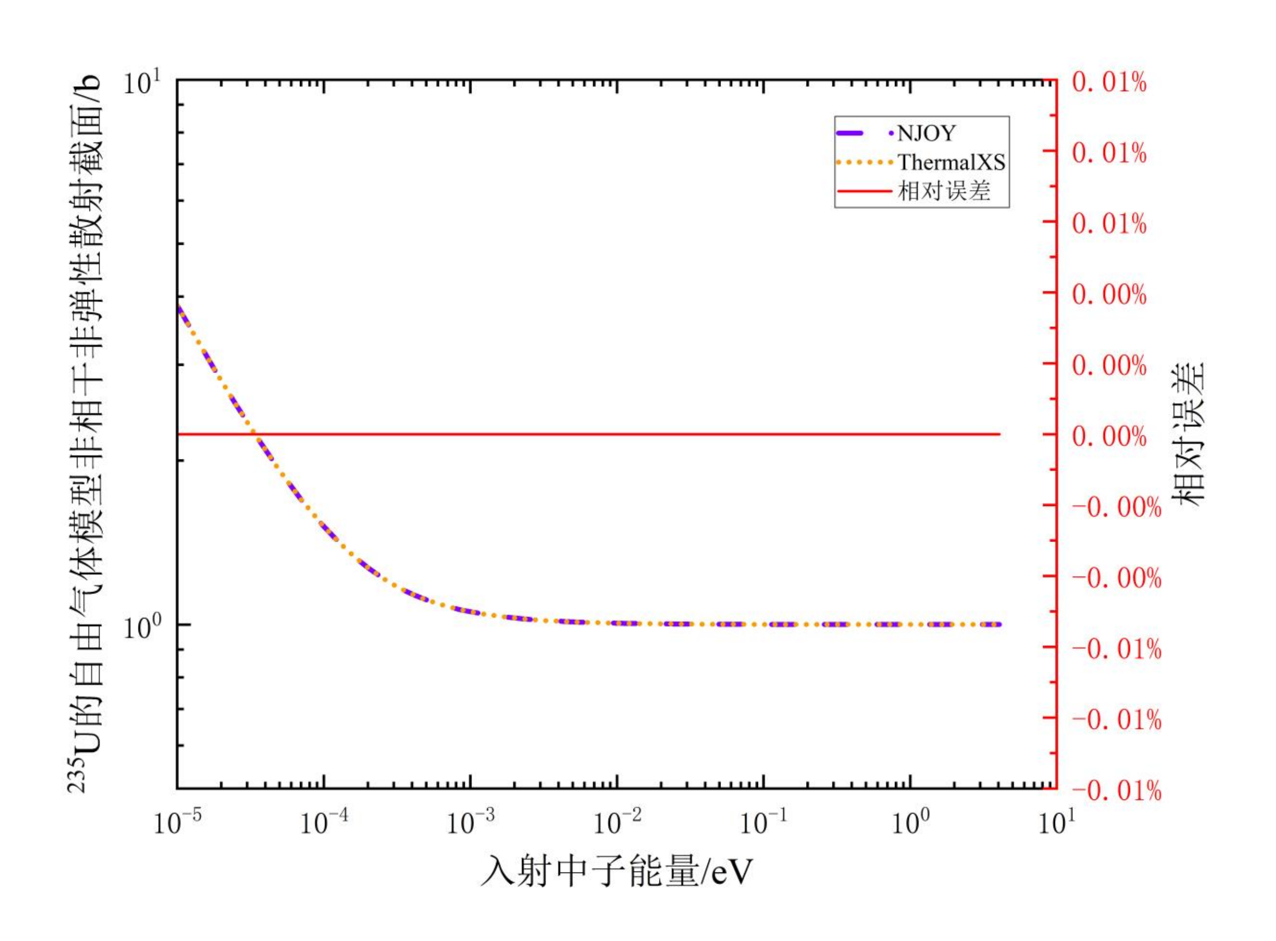



图 6 $^{235}$U 的自由气体模型(在线彩图)

相比于 NJOY 程序中的 THERMR 模块，ThermalXS 模块实现了入射能量网格的自适应变化。THERMR 模块热散射截面计算采用内置的 118 个点固定能量网格，这种类型的网格计算精度较差，特别在处理金属氢化物时无法准确体现非相干非弹性的振荡现象。ThermalXS 基于非弹性散射热散射律数据 $S(\alpha,\beta)$中包含的无量纲能量转换量 $\beta$ 网格建立自适应能量网格，自适应能量网格相比固定能量网格更密且与材料相关，ThermalXS 程序计算的金属氢化物非相干非弹性散射截面可以看出明显的振荡，THERMR 模块与 ThermalXS 模块计算结果对比如图 7 所示。

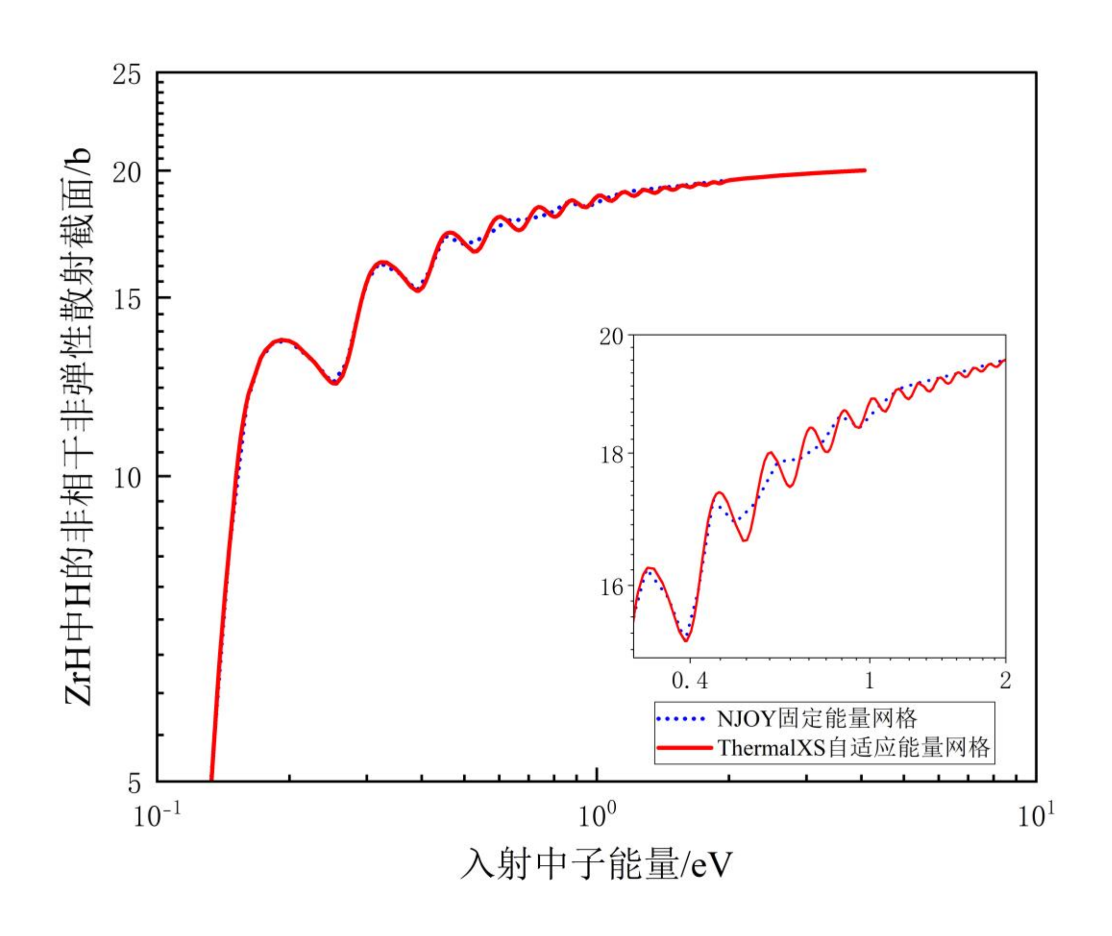



图 7 基于不同能量网格的 ZrH 非相干非弹性散射截面对比(在线彩图)

## 3 基于 ThermalXS 的石墨热散射截面分析

### 3.1 ENDF/B 热散射律库变化与相关实验介绍

石墨慢化剂对于新一代反应堆的设计建造具有重要作用，国内外科研人员致力于研究出更精确的石墨热散射数据， ENDF/B 评价核数据库就在不断更新、完善石墨的热散射律文件。 ENDF/B-VII.1 库中石墨只有一个热散射律文件，ENDF/B-VIII.0 评价核数据库中石墨热散射律文件增加为三个，分为晶体石墨、孔隙度百分之十与孔隙度百分之三十的反应堆石墨，以上热散射律文件皆由 NJOY-LEAPR 模块计算生成。最新的 ENDF/B-VIII.1 版本热散射律数据在 ENDF/B-VIII.0 的基础上新增了考虑一声子修正以及非立方模型的石墨和孔隙度百分之二十的反应堆石墨热散射律数据文件，使用 FLASSH(Full Law Analysis Scattering System Hub)程序生成[20]，非立方公式是一声子修正实现的前提。与热散射截面计算结果对比所用实验相关信息如表 1 所示，实验数据来自于 EXFOR 数据库，X4 表示该数据在数据库中的编号。

表 1 实验数据相关信息

| 实验人 | 实验时间 | EXFOR 编号 | 样本类型 | 样本密度(g/cm³) | 孔隙度(%) | 测试温度(K) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Neil | 1965 年 | 14181002 | 多晶石墨 | 2.2 | – | 300 |
| Steyerl 1 | 1974 年 | 21016002 | 多晶石墨 | 2.240 | – | 295 |
| Steyerl 2 | 1974 年 | 21016004 | 涂层电石墨 | 1.715 | 24 | 295 |
| Bowman | 2008 年 | 14232002 | 颗粒状石墨 | 1.030 | - | 295 |
| Robledo | 2020 年 | 237210022 | 等静压石墨 | 1.740 | 23.2 | 296 |

1965 年 Neil 等人对多晶石墨(Polycrystalline Graphite)样品在 $10^{-3}eV$ 以上能区的热散射截面进行了实验测量。1974 年 Steyerl 等人分别采用多晶石墨和中子瓶(Neutron Bottle)[22]进行了两项实验，为避免下文中混淆，本文将多晶石墨实验称为 Steyerl1 中子瓶实验称为 Steyerl2 ，Steyerl1 实验在 295*K* 温度下进行，所用多晶石墨厚 3.8*mm*,密度为 2.24$g/cm^3$，该实验数据主要集中在 $10^{-3}eV$ 以下能区。中子瓶实验中使用了表层涂有 2-3$\mu m$ 均匀、多孔、高纯度热解石墨的柱状电石墨(electro-graphite)，柱体密度为 1.715$g/cm^3$，涂层密度为 2.05 $g/cm^3$。

Bowman 实验[21]是将平均密度 1.03 $g/cm^3$ 的粉状石墨填充在一个直径 8 英尺高 8 英尺的罐中进行散射实验，由于该石墨样本被粉碎，所以无法计算精确孔隙度，选择该实验的理由是：高温气冷堆建造中用到的石墨材料，除了块状石墨反射层外，还有装在燃料盒中的石墨粉，将 Bowman 粉状石墨实验与程序计算值做对比，对于气冷堆研究有一定实际意义。2020 年 CAB 的 J.I.Robledo[24]等人用 VESUVIO 飞行时间光谱仪测量等静压石墨样品的总截面,所使用的石墨样本在 CAB2010 年一篇研究孔隙度对石墨总截面影响的文章中有提到，石墨样本重 196.8*g*，密度为 1.740 $g/cm^3$,孔隙度经公式计算得约为 23%[23]。

**3.2 ENDF/B-VII.1、ENDF/B-VIII.0 以及 ENDF/B-VIII.1 评价库晶体石墨热散射截面与实验值对比分析**

相比于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库，ENDF/B-VIII.0 评价核数据库中北卡罗来纳州立大学(NCSU)建立了新的石墨模型，采用较为先进的从头计算晶格动力学(AILD)来计算晶体石墨的声子态密度[17]，将声子态密度作为输入，由 NJOY-LEAPR 模块计算出晶体石墨的热散射律数据(tsl-crystalline-graphite)。ENDF/B-VIII.1 版本评价核数据库使用 FLASSH (Full Law Analysis Scattering System Hub)程序生成了考虑一声子修正以及非立方模型的石墨热散射律文件(tsl-graphiteSd)和孔隙度 20%的反应堆石墨文件(tsl-reactor-graphite-20P)，消除了非相干近似与立方近似引入的误差。分别基于 ENDF/B-VII.1、ENDF/B-VIII.0、ENDF/B-VIII.1 评价核数据库[17] ，计算得到 296*K* 温度下的石墨的非弹性散射截面如图 8 所示。

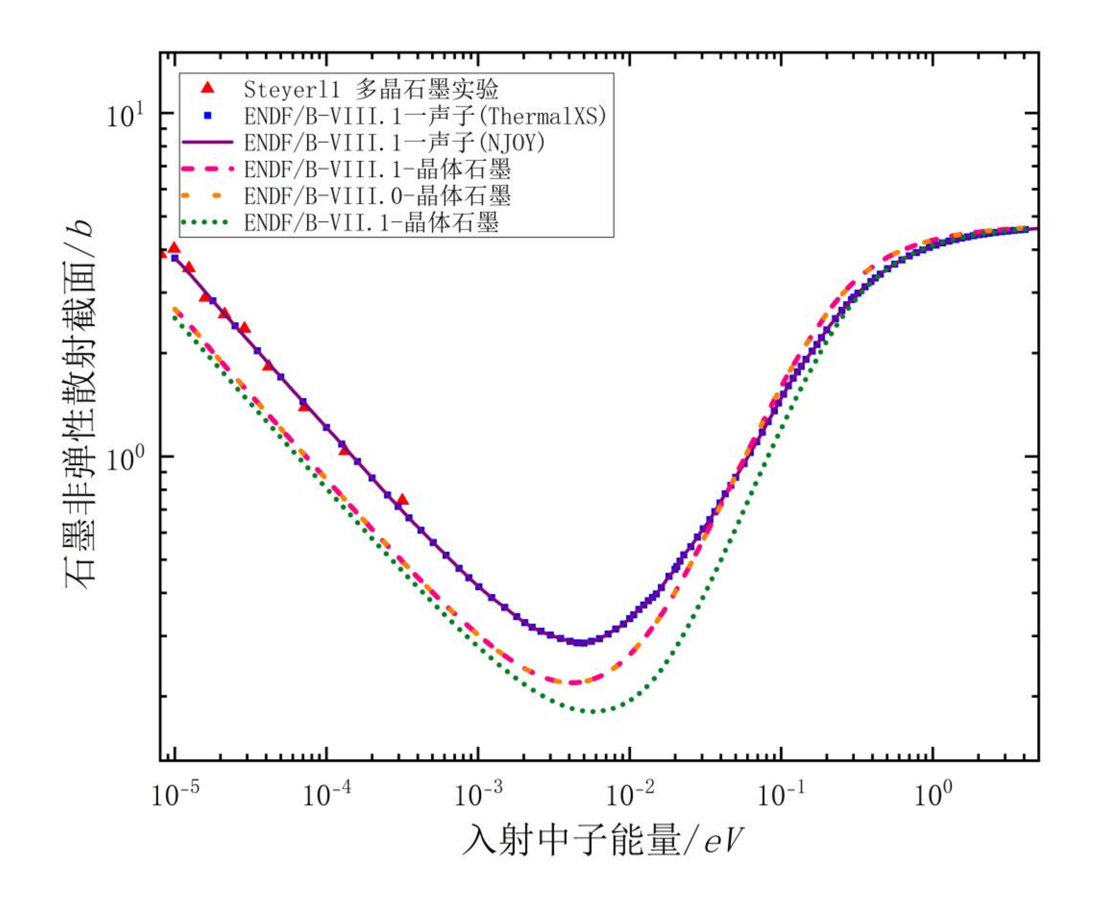



图 8 引入一声子修正的石墨热散射截面与晶体石墨热散射截面及实验值对比(在线彩图)

由图 8 可见,ENDF/B-VIII.0 与 ENDF/B-VIII.1 晶体石墨非弹性散射截面基本相同并略高于 ENDF/VII.1 的晶体石墨热散射截面。这是由于 ENDF/B-VIII.0 与 ENDF/B-VIII.1 晶体石墨热散射律数据评估所用的声子态密度是由第一性原理计算方法从头计算晶格动力学(AILD)计算得到，该方法可以更准确的模拟材料的晶体性质，从而使计算出的截面更接近实验值。但是上述三组截面仍小于实验数值，这是由于石墨晶体为原子间力为各向异性的非立方晶体，热散射律数据计算程序 LEAPR 中使用了立方近似与非相干近似，会为石墨的热散射律以及热散射截面计算引入较大误差。 ENDF/B-VIII.1 引入非立方公式及一声子修正的石墨非弹性散射截面计算结果显著高于之前版本的截面且与 Steyerl1 实验数据符合较好,说明去除非相干近似以及立方近似对于精确计算石墨等各向异性晶体的截面具有重要意义。

### 3.3 ENDF/B-VIII.1 评价库不同孔隙度核反应堆石墨热散射截面对比

在研究中发现石墨的孔隙度会导致低能区的石墨实测总截面大于理论计算得出的总截面，因此 ENDF/B-VIII.0 版本开始加入具有孔隙度的反应堆石墨热散射律文件，晶体石墨的声子态密度采用基于第一性原理的从头计算晶格动力学(AILD)计算，反应堆石墨的声子态密度采用经典分子动力学(MD)，孔隙度

的模拟方法是随机地从晶体结构中移除原子，并以此生成声子态密度，进而计算出热散射律数据。如 3.1 所述，ENDF/B-VIII.0 评价库中石墨热散射律文件相比 ENDF/B-VII.1 新增了孔隙度 10%的反应堆石墨(tsl-reactor-graphite-10P)以及孔隙度 30%的反应堆石墨[25](tsl-reactor-graphite-30P)，ENDF/B-VIII.1 评价库新增了孔隙度 20%的反应堆石墨(tsl-reactor-graphite-20P)。

为了研究不同孔隙度的热散射律数据对热中子散射截面的影响，本文采用 ThermalXS 程序，分别读取了 ENDF/B-VIII.0、ENDF/B-VIII.1 热散射律库中的晶体石墨、孔隙度 10%与 30%反应堆石墨以及 ENDF/B-VIII.1 孔隙度 20%核反应堆石墨的热散射律数据，计算得到了总热中子散射截面。不同孔隙度的热中子散射截面与实验值对比如图 9 所示。

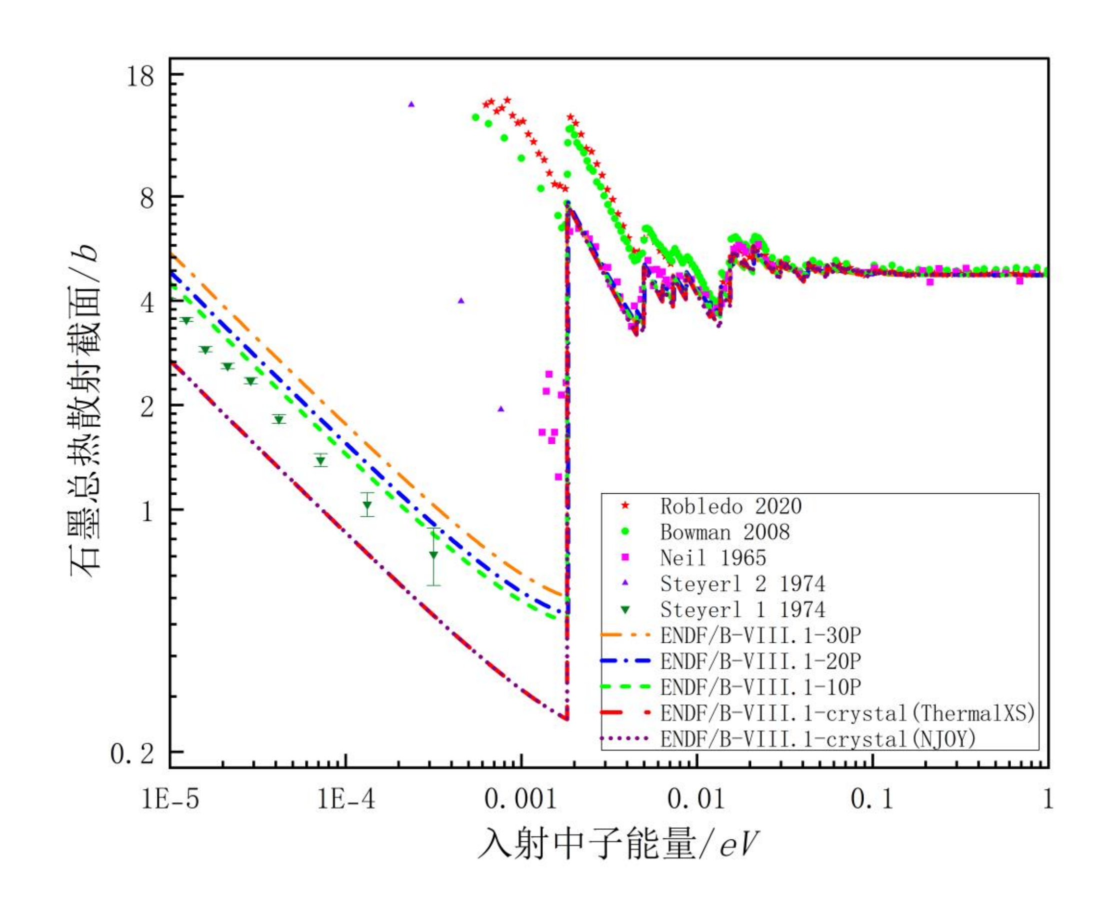



图 9 具有孔隙度的核反应堆石墨热散射截面与实验值对比（在线彩图）

由图 9 可见，ENDF/B-VIII.0 与 ENDF/B-VIII.1 中同名石墨热散射律文件计算得到的热散射截面基本相等，在第一布拉格峰以下，ThermalXS 计算得到的总热散射截面大小关系为：30%反应堆石墨>孔隙度 20%反应堆石墨>孔隙度 10%反应堆石墨>晶体石墨，说明 ENDF/B 评价库中的热散射律文件已经可以体现出热散射截面随孔隙度上升的规律，在第一布拉格峰及以后，总热散射截面同时包含非弹性散射与弹性散射的

贡献，可以看到所有热散射截面计算结果基本重合。带孔隙度的石墨与不带孔隙度的石墨截面计算在计算流程上是一样的，不需要特殊处理。

将计算结果与实验值对比可以发现：Neil 晶体石墨实验结果主要分布在第一布拉格峰及之后的能量区间，与 ThermalXS 计算得到的总热散射截面符合较好；Steyerl2、Bowman、Robledo 实验所用石墨样品具有孔隙，Robledo 实验样品孔隙度为 23.2%，Bowman 实验[25]采用粉状石墨，虽无法计算出具体孔隙度但仍可视为具有孔隙（实验具体参数信息见 3.1），这两组实验数据在 0.01$eV$ 以下的能量区间都远大于 ThermalXS 热散射截面计算结果，在 0.0018eV 以下总截面等于非弹性散射截面，在 0.0018$eV$ 到 0.01$eV$ 之间总截面主要由相干弹性散射贡献，说明 ENDF/B 评价库有孔隙度的石墨热散射律文件中的非弹性散射律数据、相干弹性散射律数据都无法准确评估具有孔隙度石墨的截面。

孔隙度增大导致石墨热散射截面增加的原因是：反应堆石墨大小不一的孔隙中填充着空气，中子在穿过多孔石墨中的许多固体/空气界面时会发生折射，较多的孔隙会比纯晶体石墨中发生更多的小角度散射，最终导致总截面增加，而目前热散射律以及热散射截面计算的方法模型无法充分模拟空气/固体界面对于散射的影响，说明热散射数据计算程序的功能有待进一步完善。Steyerl2、Bowman、Robledo 的实验结果在 0.0018eV 以下与评价数据库具有明显差异可能跟孔隙度有关，具体原因有待进一步研究。

# 4 结论

本文基于中子热散射理论，采用面向对象编程 Fortran2003 语言，在 AXSP 程序中开发了热散射截面处理程序 ThermalXS，基于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库 $UO_2$ 中 $^{235}U$、$H_2O$ 中 H 以及 ZrH 中 H 的热散射律数据计算出对应的热散射截面，并与 NJOY 程序的计算结果对比验证，证明 ThermalXS 计算得到的热中子散射截面正确，精度较高。ThermalXS 还采用了自适应入射能量网格，相比 NJOY 的固定能量网格可以更好的描述金属氢化物非弹性散射截面的波动现象。

在此基础上，用 ThermalXS 程序全面计算了 ENDF/B-VII.1、ENDF/B-VIII.0、ENDF/B-VIII.1 评价核数据库中的石墨热散射律文件，并进行了同版本的横向对比、不同版本的纵向对比以及计算值与实验值的对比并得到以下结论：

基于 ENDF/B-VIII.1 引入非立方公式与一声子修正的石墨热散射律文件计算得到的非弹性散射截面值在低能区相比引入非相干近似与立方近似的晶体石墨截面有明显增大，与实验值符合较好，证明用非立方公式与一声子修正消除非立方近似、非相干近似可有效提高晶体石墨热散射律数据的准确度。国内暂未有

其他单位对 ENDF/B-VIII.1 石墨热散射律文件进行计算验证，本工作可为国内相关研究提供参考

ThermalXS 程序计算结果显示石墨热散射截面大小关系为：孔隙度 30%反应堆石墨>孔隙度 20%反应堆石墨>孔隙度 10%反应堆石墨>晶体石墨，说明了石墨热散射截面随孔隙度增大而增大。但是计算得到的 $10^{-2}$eV 以下热散射截面仍远小于具有孔隙度的反应堆石墨的实验数据。说明目前热散射律计算的方法模型无法充分模拟孔隙中空气/固体界面对于散射的影响，说明热散射数据生成模块的功能有待进一步完善。

## 参考文献:


[1] WEN Lili,WU Haicheng,WU Xiaofei,et al.Development of Thermal Neutron Scattering Data Processing Code TSC[J]. Atomic Fnergy Science and Technology, 2017, 51 (04): 591-596. (in Chinese ).doi: 10.7538/yzk.2017.51.04.0591
温丽丽, 吴海成, 吴小飞, 等. 热中子散射数据处理程序 TSC 的研制 [J]. 原子能科学技术, 2017, 51 (04): 591-596. doi:10.7538/yzk.2017.51.04.0591

[2] JIANG Duoyu,JIANG Xinbiao,WANG Lipeng,et al.Study on Positive Temperature Effeet of the Lithium Hydride Moderator[J] MODERN APPLIED PHYSICS,2017,8(01):10-15. (in Chinese ).doi: 10.12061/i.issn.2095-6223.2017.010202
姜夺玉, 江新标, 王立鹏, 等. 氢化锂慢化剂正温度效应分析[J].现代应用物理,2017,8(01):10-15. doi: 10.12061/i.issn.2095-6223.2017.010202

[3] LI Wanlin,WANG Kan,YU Ganglin. Thermal scattering data processing and development of Thermc module[J]. HIGH POWER LASER AND PARTICLE BEAMS ,2017,29(03):117-121. (in Chinese ). doi:10.11884/HPLPB201729.160326
李万林,王侃,余纲林.热化数据处理功能研究与 Thermc 模块研发[J].强激光与粒子束,2017,29(03):117-121. doi:10.11884/HPLPB201729.160326

[4] ZHU Y, HAWARI A I. Full law analysis scattering system hub (FLASSH)[C]Proceedings of the PHYSOR 2018.Cancun, Mexico: [s.n.],2018.

[5] NALIBOFF Y D, KOPPEL J U. HEXSCAT: Coherent elastic scattering of neutrons by hexagonal lattices[R]. USA: General Atomic Report, 1964.

[6] Honeck, H C, and Finch, D R. FLANGE II (VERSION 71-1): A CODE TO PROCESS THERMAL NEUTRON DATA FROM AN ENDF/B TAPE[R]. United States: Savannah River Laboratory, 1971. Web. doi:10.2172/4690276.

[7] MACFARLANE R, MUIR D W, BOICOURT R M, et al. The NJOY Nuclear data Processing System, Version 2016[R].New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2018. doi:10.2172/1338791 Actions

[8] ZU T, XU J, TANG Y, et al. NECP-Atlas: A new nuclear data processing code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 123: 153-161. 10.1016/j.anucene.2018.09.016

[9] YU Jiankai,LI Songyang,WANG Kan,et al. Development and Validation of Nuclear Cross Section Processing Code for Reactor Analysis-RXSP [J]. Nuclear Power Engineering,2013,34(S1):10-13. (in Chinese ).doi: 10.3969/j.issn.0258-0926.2013.z1.003
余 健 开 , 李 松 阳 , 王 侃 , 等 . 反 应 堆 用 核 截 面 处 理 程 序 RXSP 的 研 发 与 验 证 [J]. 核 动 力 工 程 ,2013,34(S1):10-13. doi: 10.3969/j.issn.0258-0926.2013.z1.003

[10] LIU Ping,WU Xiaofei,LI Songyang,et al. Development of Multi-group Constant Processing Software Ruler [J]Atomic Energy Science and Technology,2018,52(07):1153-1159. (in Chinese ) doi:10.7538/yzk.2018.52.07.1153
刘萍, 吴小飞, 李松阳, 等. 群常数制作软件 Ruler 研发[J].原子能科学技术,2018,52(07):1153-1159. doi:10.7538/yzk.2018.52.07.1153

[11] HU Kui, MA Xubo, MA Xuan, et al. Development and verification of a new nuclear data processing code AXSP[J/OL]. Frontiers in Energy Research, 2022, 10: 1009515. doi:10.3389/fenrg.2022.1009515

[12] ZU Tiejun,TANG Yongqiang,CAO Liangzhi,et al. Calculation and Analysis of Thermal Scattering law of Zirconium Hydride Based on First principles Calculation[J] Atomic Energy Science and Technology, 2022,56(01):106-112. (in Chinese ).doi: 10.7538/yzk.2021.youxian.0273
祖铁军, 汤勇强, 曹良志, 等. 基于第一性原理的氢化锆热散射律计算分析[J].原子能科学技术,2022,56(01):106-112. doi: 10.7538/yzk.2021.youxian.0273

[13] WANG Guanbo,WANG Kan,YU Ganglin. Process of ACE Formatted Thermal Scattering Data SabDEP andResearch on Thermal Data Interpolation[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2011,45(07):785-789. (in Chinese ).
王冠博,王侃,余纲林.热化截面库 SabDEP 制作与热化截面插值方法[J].原子能科学技术,2011,45(07):785-789.

[14] HERMAN M, TRKOV A. ENDF-6 format manual, data format and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF/B-VI and ENDF/B-VII[R]. New York: Brookhaven National Laboratory, 2009.doi: 10.2172/981813

[15] TANG Yongqiang,ZU Tiejun,YI Siyu,et al. Development and Verification of Thermal Neutron Scattering Law Data Producing Module in Nuclear Data Processing Code NECP-Atlas.[J] Atomic Energy Science and Technology, 2020,54(12):2314-2322. (in Chinese ).doi: 10.7538/yzk.2020.youxian.0029

汤勇强,祖铁军,易思宇,等.NECP-Atlas 中热中子散射律数据生成模块的开发与验证[J].原子能科学技术,2020,54(12):2314-2322. doi: 10.7538/yzk.2020.youxian.0029
[16] CHADWICK M B, HERMAN M, OBLOŽINSKÝ P , et al. Nuclear Data Sheets, 2011, 112(12): 2887.
[17] BROWN D A, CHADWICK M B, CAPOTE R, et al. ENDF/B-VIII.0：The 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO project cross sections, new standards and thermal scattering data[J]. Nuclear Data Sheets, 2018, 148: 1-142.doi: 10.1016/j.nds.2018.02.001
[18] ZHANG Chen,HU Kui,ZHANG Teng,et al. Multi-Group Cross Sections Processing Method Based on CENDL-3.2 Evaluated Nuclear Data Library[J]. MODERN APPLIED PHYSICS,2023,14(02):67-76. (in Chinese )doi: 10.12061/i.issn. 2095-6223.2023.020203
张辰, 胡馗, 张腾, 等. 基于 CENDL-3.2 评价核数据库的多群截面制作方法[J].现代应用物理,2023,14(02):67-76.doi: 10.12061/i.issn. 2095-6223. 2023.020203
[19] GALVÁN JOSA V M, DAWIDOWSKI J, SANTISTEBAN J R, et al. Model for neutron total cross-section at low energies for nuclear grade graphite[J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2015, 780: 27-32.doi: 10.1016/j.nima.2015.01.055
[20] FLEMING N C, MANRING C A, LARAMEE B, et al. *FLASSH* 1.0: Thermal Scattering Law Evaluation and Cross Section Generation[J/OL]. EPJ Web of Conferences, 2023, 284: 17007.doi: 10.1051/epjconf/202328417007
[21] CHUAN Xiuyun,ZHANG Xiaolin. PROPERTIES,TYPES，PRODUCTION AND APPLICATION OF NUCLEAR GRAPHITE IN NUCLEAR REACTORS[J]. CARBON TECHNIQUES, 2009,28(06):28-35. (in Chinese ).doi: 10.14078/i.cnki.1001-3741.2009.06.012
传秀云, 张晓琳. 核石墨材料的性能、类型、制备及其在核反应堆中的应用[J]. 炭素技术,2009,28(06):28-35. doi: 10.14078/i.cnki.1001-3741.2009.06.012
[22] STEYERL A, TRÜSTEDT W D. Experiments with a neutron bottle[J/OL]. Zeitschrift für Physik, 1974, 267(5): 379-388. doi: 10.1007/bf01669970
[23] PETRIW S, DAWIDOWSKI J, SANTISTEBAN J. Porosity effects on the neutron total cross section of graphite[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2010, 396(2-3): 181-188.doi: 10.1007/bf01669970
[24] ROBLEDO J I, DAWIDOWSKI J, DAMIÁN J I M, et al. Measurement of neutron total cross sections at the VESUVIO spectrometer[J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2020, 971: 164096. doi: 10.1016/j.nima.2020.164096
[25] BOWMAN C D, BOWMAN D C, HILL T, et al. Measurements of Thermal Neutron Diffraction and Inelastic Scattering in Reactor-Grade Graphite[J/OL]. Nuclear Science and Engineering, 2008, 159(2): 182-198.doi: 10.13182/NSE159-182

# The Development and Verification of the Thermal Scattering Cross Section Calculation Module ThermalXS in AXSP[2]

WANG Fuxing[1)] ,FU Liantao, MA Xubo

*(1. College of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing , 102206, China)*

**Abstract**：This work first developed a neutron thermal scattering cross-section calculation module, ThermalXS, using an adaptive incident energy grid in the independently developed nuclear data processing program AXSP, based on the neutron thermal scattering theory. The module calculated different types of neutron thermal scattering cross-sections using the thermal scattering law files of nuclei such as U, H, Zr, and compared them with the calculation results of the THERMR module in the NJOY2016 program, verifying the correctness of the ThermalXS module for thermal neutron calculations. On this basis, the changes in the graphite thermal scattering cross-sections in the ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, and ENDF/B-VIII.1 nuclear data libraries were analyzed and compared with experimental values. It was found that the latest ENDF/B-VIII.1 introduced a non-cubic formula and a one-phonon correction for the graphite thermal scattering cross-section, which compared to the incoherent approximation, showed better agreement with experimental values. The calculated reactor graphite thermal scattering cross-sections in ENDF/B-VIII.1 were found to increase with increasing porosity but were still much smaller than the experimental data for porous graphite, indicating that the functionality of the thermal scattering data generation module needs further improvement..

**Keywords**：Neutron thermal scattering; Double-differential scattering cross-section; ThermalXS; Reactor grade graphite

**Received date**：2024-10-22；**Revised date**：2024-11-29
**Foundation item**：National Natural Science Foundation of China(11875128)
1) WANG Fuxing,E-mail:fx280011@ncepu.edu.cn
**Corresponding author**: MA Xubo, E-mail: maxb@ncepu.edu.cn